

分子動力学シミュレーションによる Bi_2Te_3 の格子振動解析

○古起 大、澤口 直哉、河内 邦夫、佐々木 眞

室蘭工業大学大学院 工学研究科 (〒050-8585 室蘭市水元町 27 番 1 号)

【目的】 実用化されている熱電デバイス材料である Bi_2Te_3 はフォノン成分の熱伝導度 κ_p が小さいために熱電特性が優れていると考えられており、更なる性能向上を図るために κ_p を小さくすることが有効である。ここで κ_p と格子振動の間には相関があるため、 Bi_2Te_3 の格子振動への温度や他元素の微量添加が及ぼす影響の調査が必要であるが、実験的に一部の元素置換による振動状態の相違を評価することは困難である。そこで、分子動力学 (MD) 法を利用して Bi_2Te_3 の振動状態の解析を試みた。本研究では Bi_2Te_3 の格子振動に温度や組成の変化及ぼす影響を検証するための計算条件の検討と解析を行った。

【実験方法】 ソフトウェアは MXDORTO¹⁾ を用い、原子間相互作用には (1) 式の関数を用いた。式中の D_{ij} 、 β_{ij} 、 r_{ij}^* は元素対毎に定めるパラメータを示す。計算は *NPT* アンサンブルで行い、温度は 200 K から 500 K まで変化させて行った。

$$U_{ij}(r_{ij}) - D_{ij} \{ \exp[2\beta_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^*)] - 2 \exp[-\beta_{ij}(r_{ij} - r_{ij}^*)] \} \quad (1)$$

【結果と考察】 密度を指標として Bi_2Te_3 の構造を再現できるパラメータを設定したところ、温度変化時の密度の計算値が実験値と $\pm 0.5\%$ 以内の値で再現できた。次に、 Bi_2Te_3 のパラメータをベースにして Sb_2Te_3 と Bi_2Se_3 のパラメータを設定し、同様に密度の実験値と比較した結果、300 K における実験値の $\pm 0.5\%$ 以内の値を再現することができた。以上のパラメータを用いて算出したパワースペクトルを Fig. 1 に示す。Fig. 1 から、それぞれの物質の面内方向 (in plane) と垂直方向 (cross plane) のスペクトルを比較すると異方性があることがわかる。また、Bi に比較して Sb のスペクトルは高波数に現れること、Se は Te に比較してフォノン密度が小さいことが確認された。以上から、フォノン成分には Bi サイトに存在する元素より Te サイトに存在する元素の及ぼす影響が大きいと考えられる。

【参考文献】

- 1) K. Kawamura, MXDORTO, *Japan Chemistry Program Exchange*, #29.
- 2) M. Matsui, *Journal of Chemical Physics*, **91** (1989) 489-494.
- 3) M. H. Francombe, *British Journal of Applied Physics*, **9** (1958) 415.

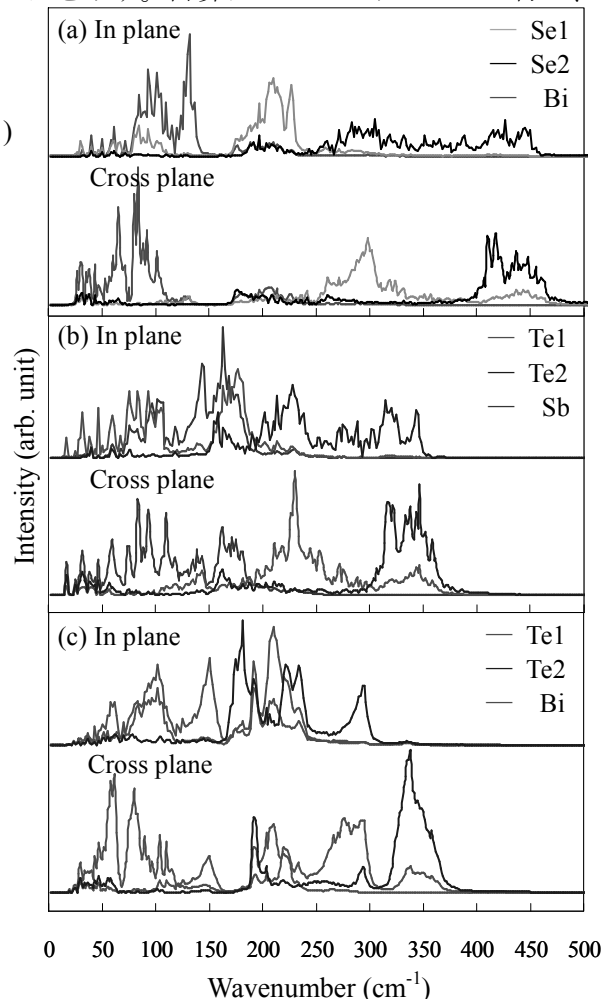


Fig. 1. The directional power spectra for each materials with respect to wavenumber; (a) Bi_2Se_3 , (b) Sb_2Te_3 , (c) Bi_2Te_3 .